

针对时-空中子输运方程的 算子推断方法及数据同化研究

张鹏飞

上海交通大学

核能科学与核安全所

饮水思源 · 爱国荣校



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论





上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论



研究背景：堆芯中子学模拟



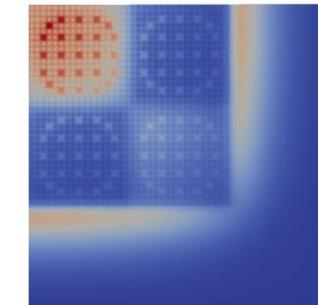
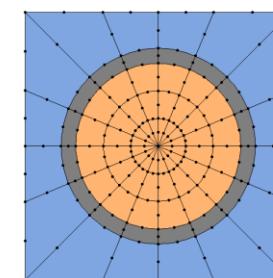
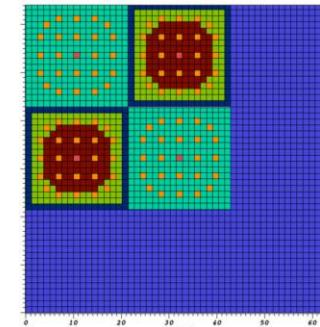
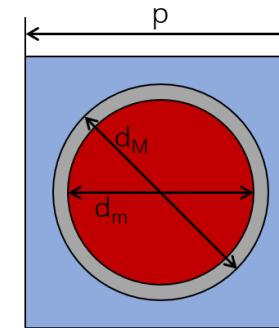
核反应堆堆芯中存在着复杂的物理过程，需要借助先进中子学模拟方法模拟中子与介质的相互作用，为反应堆设计与分析提供基础

玻尔兹曼时空中子输运方程

$$\frac{1}{v(E)} \frac{d}{dt} \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \\ - \Sigma_t(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + q(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \\ + \int dE' \int d\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \Omega \cdot \Omega', E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E', t)$$

- 运输方程的
变量离散方法
- r 空间离散：有限元、特征线...
 - Ω 角度离散： S_N 方法、 P_N 方法
 - t 时间离散：隐式差分、准静态...
 - E 能量离散：多群

数值反应堆高保真模拟

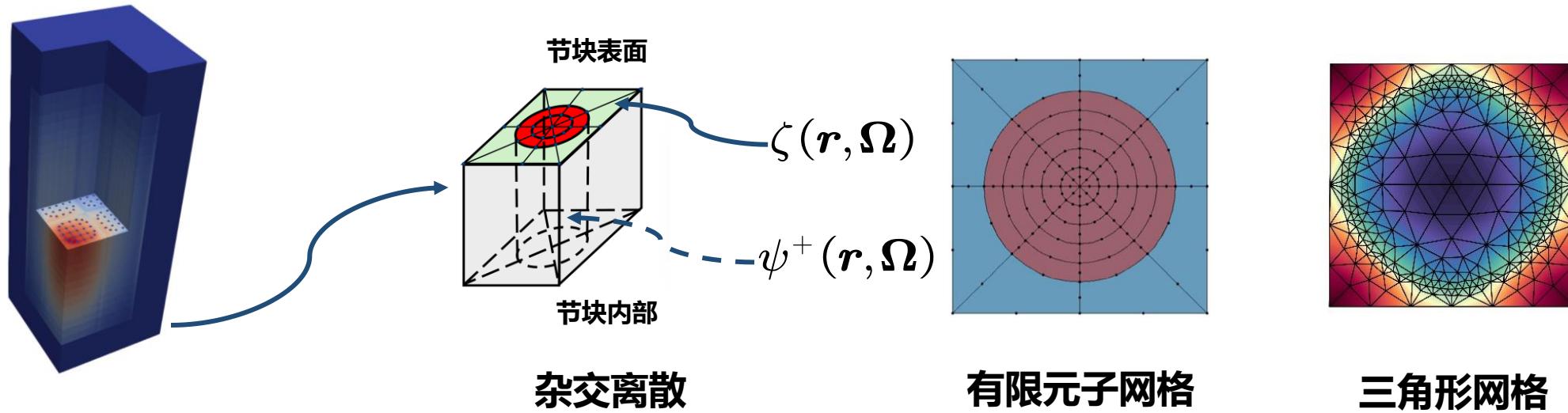


高精度、高分辨率、高置信度

研究背景：非均匀变分节块法



非均匀变分节块法 (HVNM) 基于变分原理构造求解方程，采用杂交方法对节块内部与表面进行离散，可以采用**非结构三角形网格/有限元子网格**描述栅元几何与材料分布



展开阶数、**h/p加密灵活** **无横向积分**，稳定性好

研究背景：模拟与测量数据同化

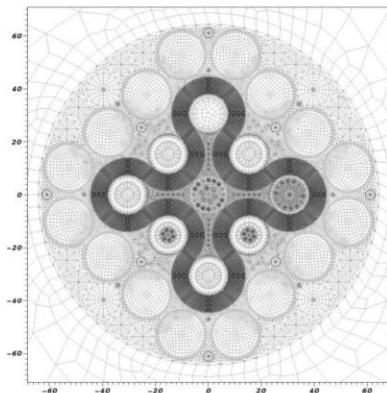


高分辨率数值模拟方法也存在多方面的挑战，可以结合实测数据通过**数据同化**获得堆芯真实状态的最优估计

数学模型与真实物理过程

纯数值模拟

模型误差
离散误差
参数不确定性
迭代收敛误差



数学模型



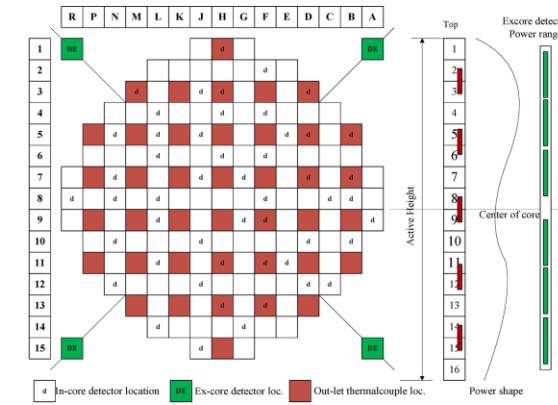
真实物理值

模拟数据

+

测量数据

数据同化



堆芯探测器

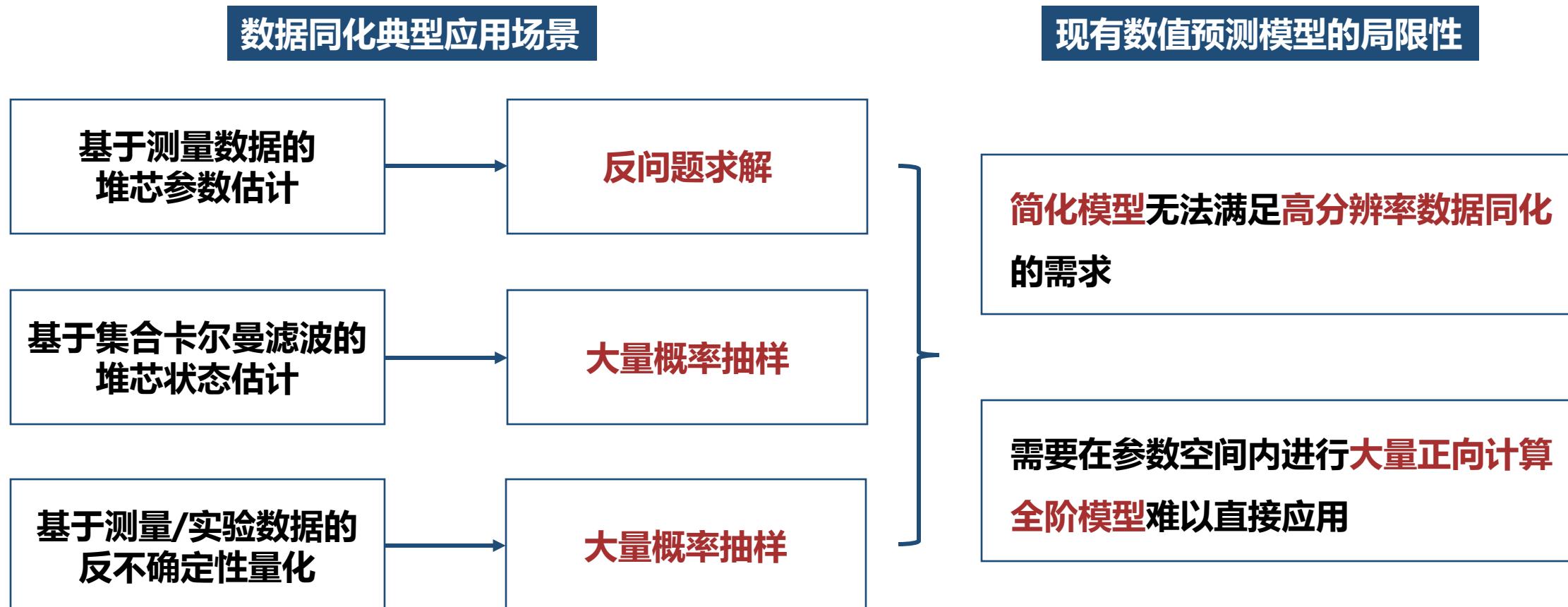


物理值最佳估计

研究背景：模拟与测量数据同化



数据同化方法能够结合多源测量值、数值模拟预测实现堆芯的**最优状态估计**、**功率重构**、**参数估计**等。而**简化模型与全阶模型**难以直接满足数据同化需求



研究背景与挑战：基于高分辨率数据的降阶模型



高分辨率数据具有**维度高、数据获取难度大**等特点，降阶预测模型应能够描述中子输运的**动力学特征**，同时拥有**低训练成本与高泛化能力**

基于高分辨率数据的降阶模型

高分辨率数据



提取低阶子空间特征



训练预测模型



快速预测计算

本征正交分解-伽辽金

降阶方法：

本征正交分解 (POD)

降阶动力学系统获取：

原方程伽辽金投影

局限性：

侵入式方法

动态模态分解

降阶方法：

POD

降阶动力学系统获取：

低阶特征值分解

局限性：

难以处理时变参数问题

神经网络类方法

降阶方法：

POD/自编码器

降阶动力学系统获取：

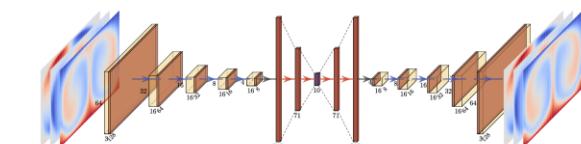
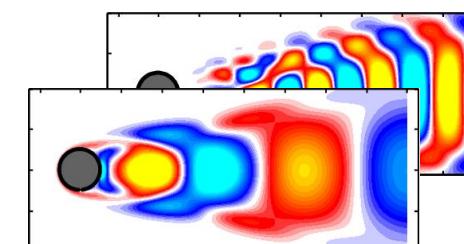
神经网络拟合

局限性：

训练成本高

可解释性弱

$$\left(\phi_i, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \right)_{L^2(\Omega)} = 0$$





上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论

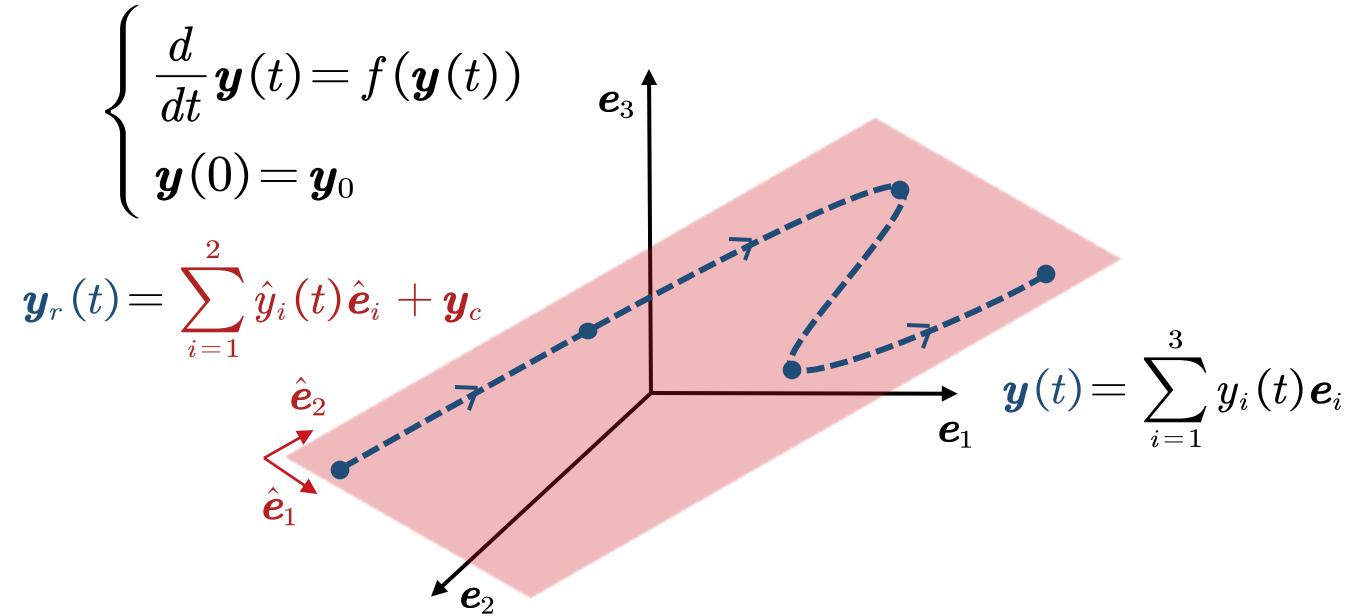


算子推断模型降阶



模型降阶的目标是寻找低维空间逼近高维空间的子集，并寻找低维空间中的演化规律

三维轨线与二维平面示意图



微分方程解的集合构成一条三维空间中的轨线，寻找合适的二维平面/降阶基，采用二维坐标/降阶状态向量描述轨线

动力系统

$$\frac{d}{dt} \mathbf{y}(t) = f(\mathbf{y}(t), \mu), \quad \mathbf{y}(t) \in X$$

全阶动力系统由已知的物理方程所描述， f
已知



$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{y}}(t) = \hat{f}(\hat{\mathbf{y}}(t), \mu), \quad \hat{\mathbf{y}}(t) \in X_r$$

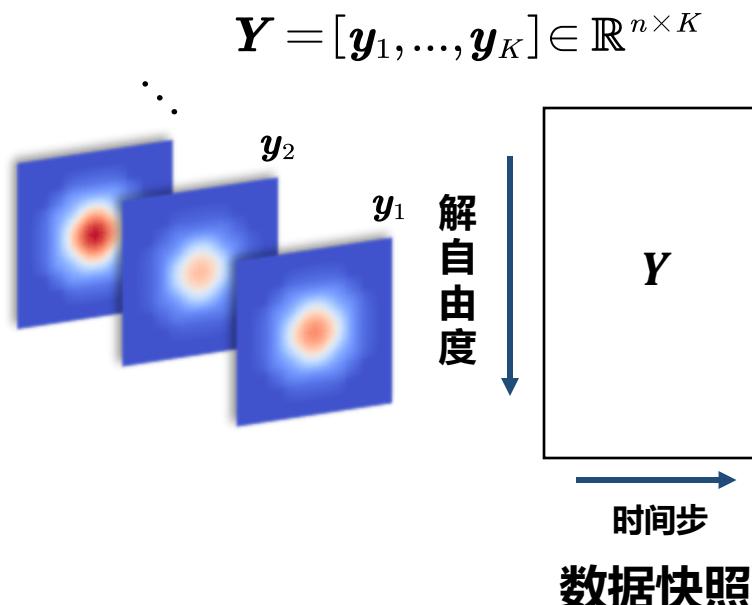
在低维空间中，时间演化规律是什么？如何
找到降阶动力系统 \hat{f} ？

算子推断模型降阶

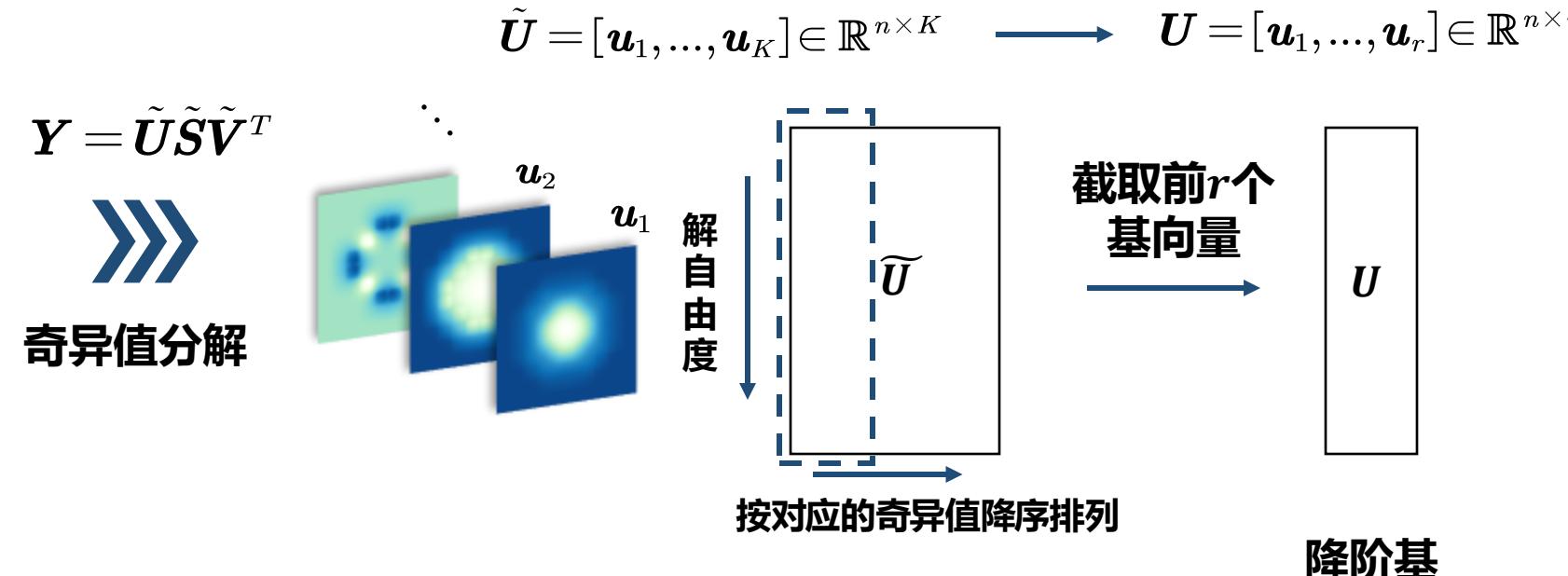


求解全阶方程获取数据快照，使用奇异值分解从快照中提取降阶基与降阶状态向量，根据残余能量等判断标准，挑选出前 r 个基向量作为降阶基，构造出低维子空间

求解全阶方程获得数据快照



通过奇异值分解提取降阶基



重要关系式

原空间向低维流形投影

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{U}^T \mathbf{y}$$

低维流形向原空间“反投影”

$$\mathbf{y} \approx \mathbf{U}\hat{\mathbf{y}}$$

算子推断模型降阶



基于原方程的形式采用投影构造出降阶方程形式，利用降阶数据集拟合降阶方程算子。该方法保留了全阶方程所描述的物理规律，并通过非侵入式方法拟合降阶模型

通过投影构造降阶动力系统

降阶关系 $\hat{\phi} = \mathbf{U}^T \phi$

全阶动力系统 (n维) $\frac{d}{dt} \phi = \mathbf{L}(\mu) \phi$

方程投影 $\frac{d}{dt} \hat{\phi} = \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}$

降阶动力系统 (r维)



构建目标函数
拟合降阶动力系统

$$\min_{\hat{\mathbf{L}}(\mu)} \left\{ \sum_{j=1}^{n_t} \left\| \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}_j - \dot{\hat{\phi}}_j \right\|_2^2 + \Gamma(\hat{\mathbf{L}}(\mu)) \right\}$$

快速求解降阶动力系统
重构高保真物理场

$$\frac{d}{dt} \hat{\phi} = \hat{\mathbf{L}}(\mu) \hat{\phi}$$

方程求解

$$\phi \approx \mathbf{U} \hat{\phi}$$

全阶解重构

算子推断模型降阶



当目标函数仅考虑相邻时间步残差时，优化问题转化为**最小二乘问题**，实现降阶算子的**快速拟合**

构造最优化问题



$$\min_{\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{f}} \sum_{i=1}^K \left\| \frac{d}{dt} \hat{\phi}_i - [\hat{A}_1 (\hat{\phi}_i \otimes \hat{\phi}_i) + \hat{A}_2 \hat{\phi}_i + \hat{f}] \right\|_2^2$$

转化为最小二乘问题

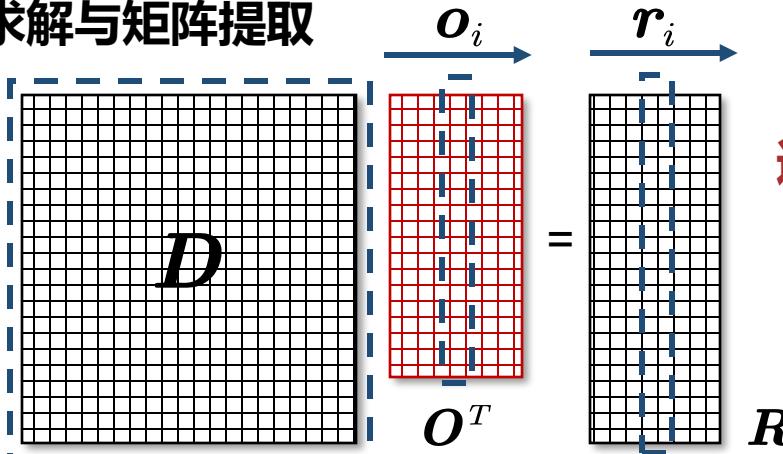


$$\min_O \|DO^T - R\|_F^2$$

$$O = [\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{f}] \in \mathbb{R}^{r \times s}$$

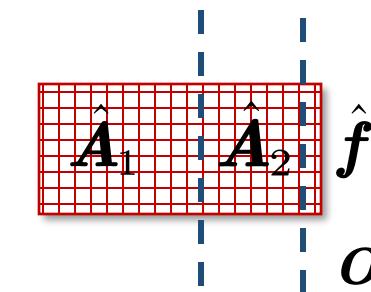
$$D = \begin{bmatrix} \hat{\phi}_1 \otimes \hat{\phi}_1 & \dots & \hat{\phi}_K \otimes \hat{\phi}_K \\ \hat{\phi}_1 & \dots & \hat{\phi}_K \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{K \times s} \quad \text{增广状态向量数据矩阵}$$
$$R = \begin{bmatrix} \frac{\hat{\phi}_1 - \hat{\phi}_0}{\delta t} & \dots & \frac{\hat{\phi}_K - \hat{\phi}_{K-1}}{\delta t} \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{K \times r} \quad \text{时间差分数据矩阵}$$

求解与矩阵提取



逐个求解最小二乘问题，
获得 O^T 矩阵的每一列

$$\min_{o_i} \|Do_i - r_i\|_F^2$$



按列将矩阵逐个提取

多物理场的控制方程中包含丰富的**先验信息**，通过引入先验信息决定降阶模型的结构，能够为降阶模型**引入明确的物理含义、降低模型的复杂度**

多物理方程中的先验信息

多物理控制方程

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} = \mathcal{F}(y_1 \cdots y_N)$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{稀疏结构} \\ \vdots \\ \text{稀疏结构} \end{bmatrix}$$

先验信息的提取



瞬发-缓发中子方程

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{L} & \hat{L}_{11} & \cdots & \hat{L}_{1n_d} \\ \hat{F}_1 & \hat{A}_1 & & \\ \vdots & \ddots & & \\ \hat{F}_{n_d} & & \hat{A}_{n_d} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix}$$

先驱核之间
无相互作用

瞬发中子-热传导方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & \hat{A}_{13} & \cdots \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & & \cdots \\ & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T} \end{bmatrix}$$

温度场没有向
中子贡献源项

$$\begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T} \\ (\hat{T} \otimes \hat{T}) \otimes \hat{\psi} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{bmatrix}$$

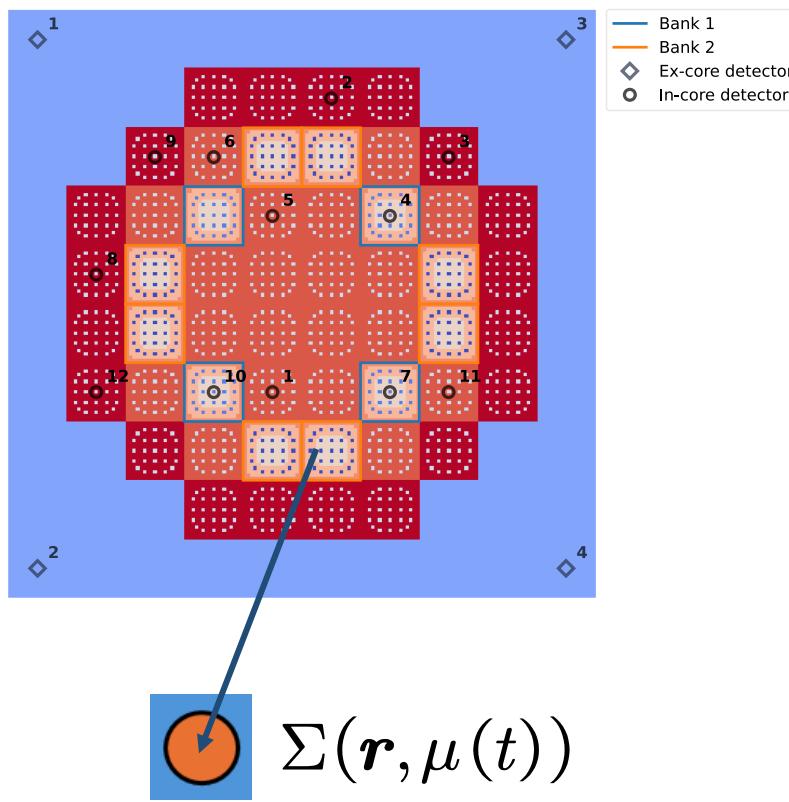
温度与中子的相互作用

方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



该问题模拟了二维堆芯的截面扰动，控制棒组件中**导向管区域中子截面随控制棒参数 $\mu_i(t)$ 发生变化**。利用**仿射参数分解与耦合约束**构造出降阶方程

问题堆芯布置



截面扰动形式

仿射参数分解与多物理约束确定模型结构



$$\Sigma(\mathbf{r}; \mu(t)) = \mu(t) \Sigma_{\text{CR}}(\mathbf{r}, t) + (1 - \mu(t)) \Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t)$$

$$= \Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t) + \mu(t) [\Sigma_{\text{CR}}(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{r}, t)]$$

原截面项

扰动截面项

算子分解



降阶方程形式

$$\mathbf{L}(\mu(t)) \psi = \mathbf{L}\psi + \mu(t) \mathbf{N}\psi$$

原线性算子

扰动线性算子项

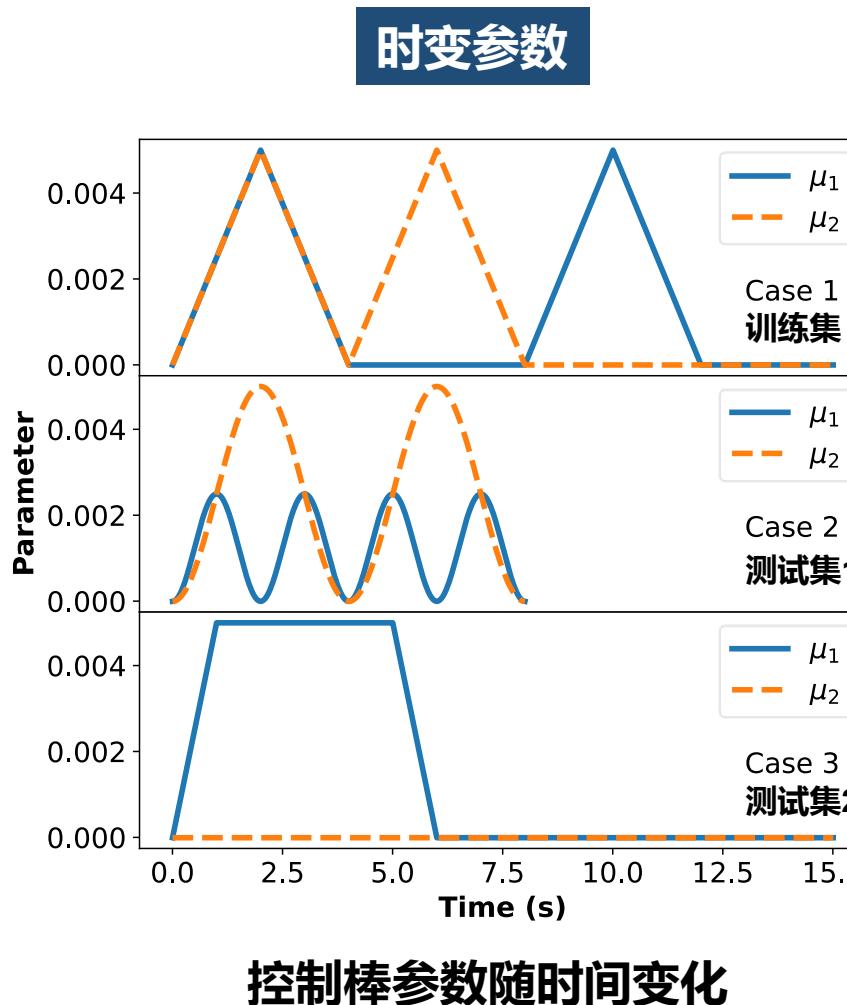
$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{\mathbf{C}}_1 \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{C}}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{L}} & \hat{\mathbf{L}}_{11} & \cdots & \hat{\mathbf{L}}_{1n_d} \\ \hat{\mathbf{F}}_1 & \hat{\mathbf{A}}_{11} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \hat{\mathbf{F}}_{n_d} & & & \hat{\mathbf{A}}_{1n_d} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{\mathbf{C}}_1 \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{C}}_{n_d} \end{bmatrix} + \sum_p \mu_p(t) \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{N}}^{(p)} \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{C}}_{n_d} \end{bmatrix}$$

导向管区域中子截面随时间发生变化

方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题

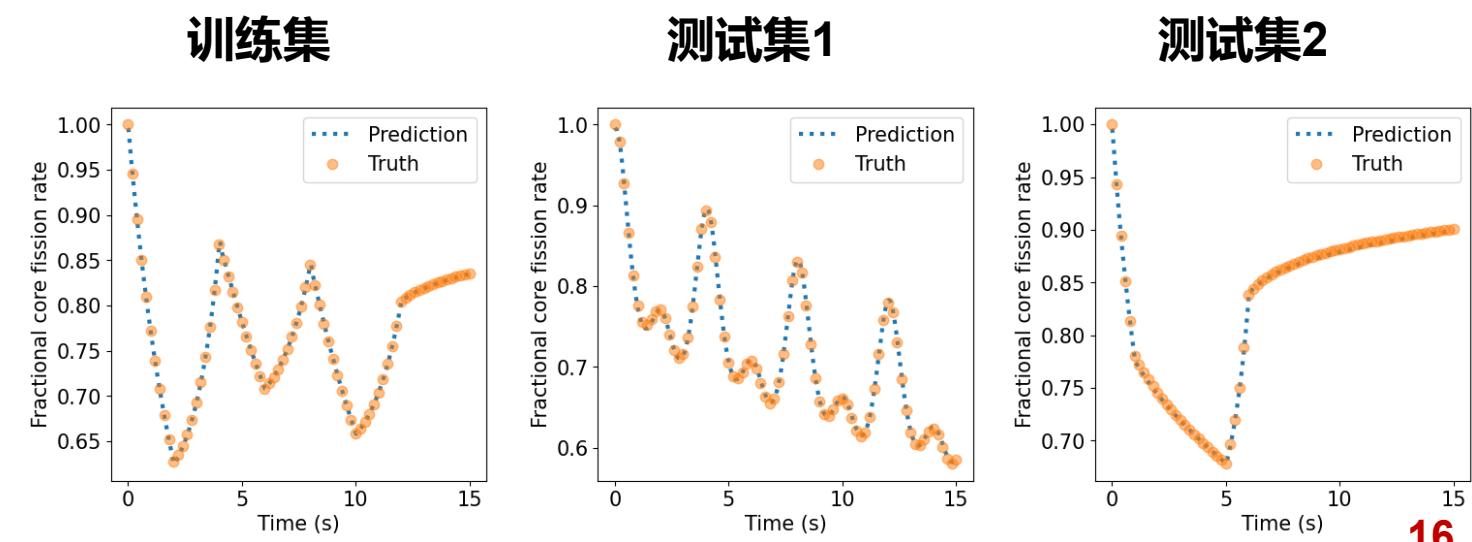


采用线性扰动参数作为训练集，在不同的参数扰动模式下进行验证与测试。在测试集中功率分布的 L_2 误差小于0.33%，降阶模型求解速度的加速比可达 10^7

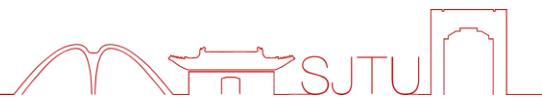


预测结果

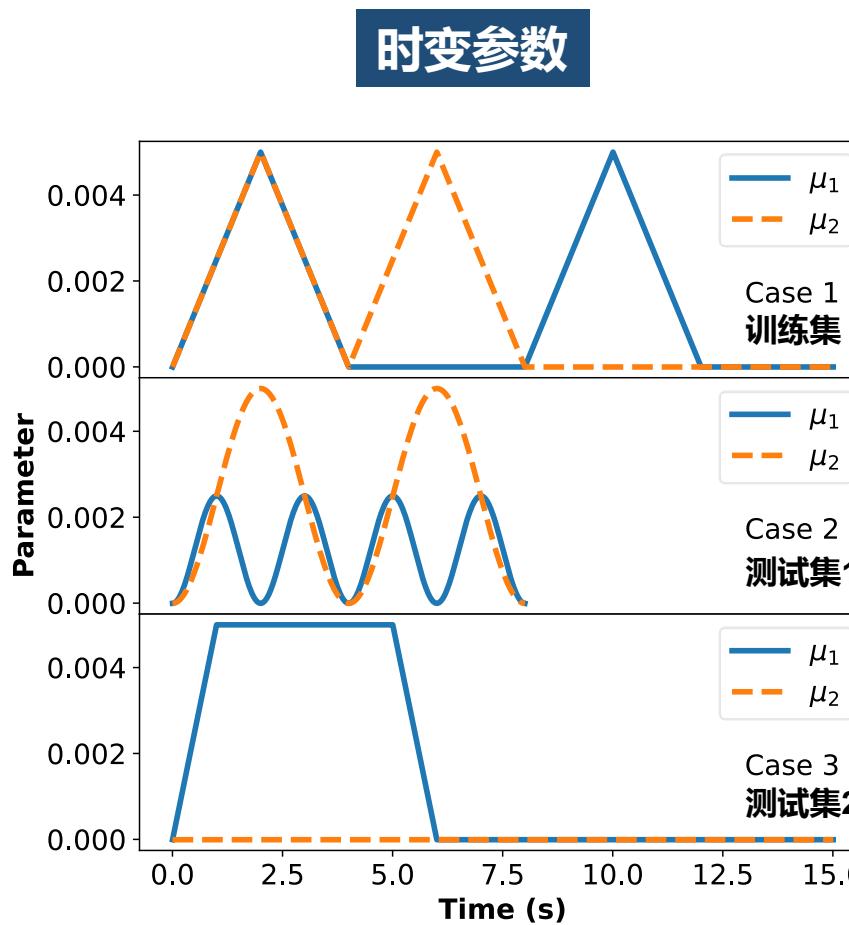
问题	L_2 误差 (%)	最大误差 (%)
训练集	0.16	2.37
测试集1	0.33	2.08
测试集2	0.23	1.92



方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题



采用线性扰动参数作为训练集，在不同的参数扰动模式下进行验证与测试。在测试集中功率分布的 L_2 误差小于0.33%，降阶模型求解速度的加速比可达 10^7



控制棒参数随时间变化

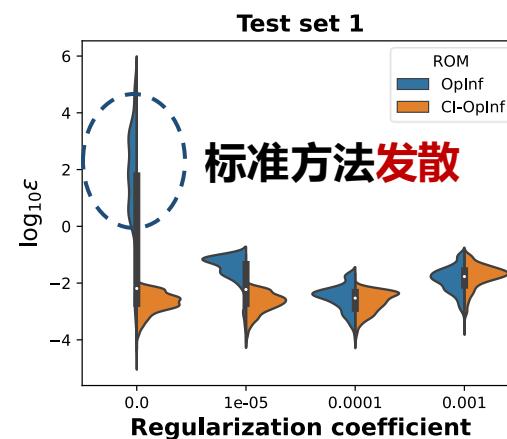
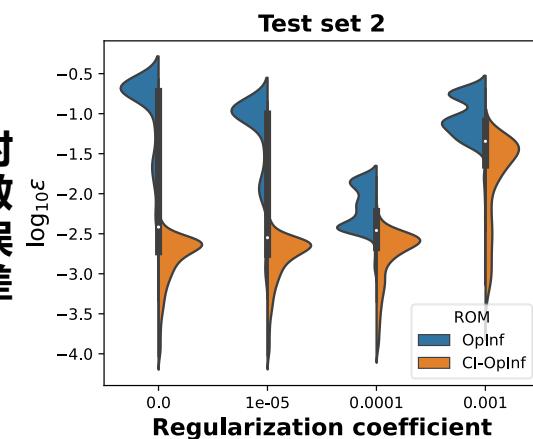
	降阶模型	全阶模型
自由度数目	11	23,582,400
求解时间 (每步)	9.1×10^{-9} 核时	0.17 核时
重构全场时间 (每步)	1.8×10^{-6} 核时	
训练集数据点数目	750	
训练时间	3.7×10^{-3} 核时	

方法验证：KAIST反应堆截面扰动问题

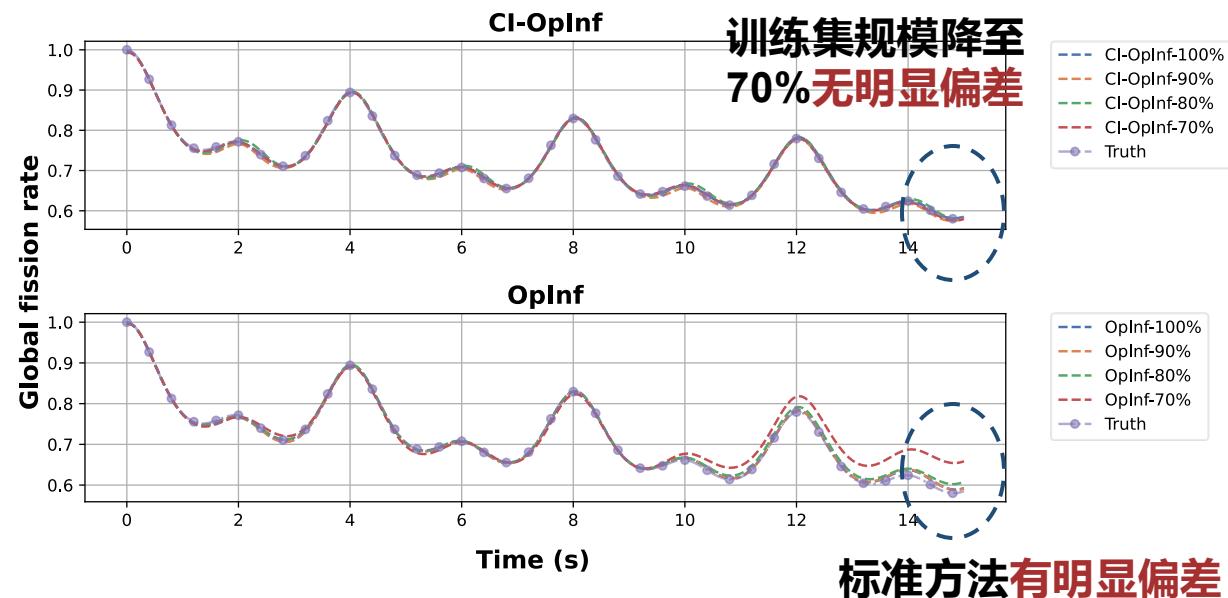


相比于传统算子推断，方程结构约束算子推断能够在弱正则化的情况下获得更为准确、稳定的预测结果；耦合约束算子推断在训练集规模减小的情况下仍能保持预测精度

不同正则项系数下的预测误差对比



不同训练集规模下的预测结果对比



测试集1

测试集2

测试集2



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

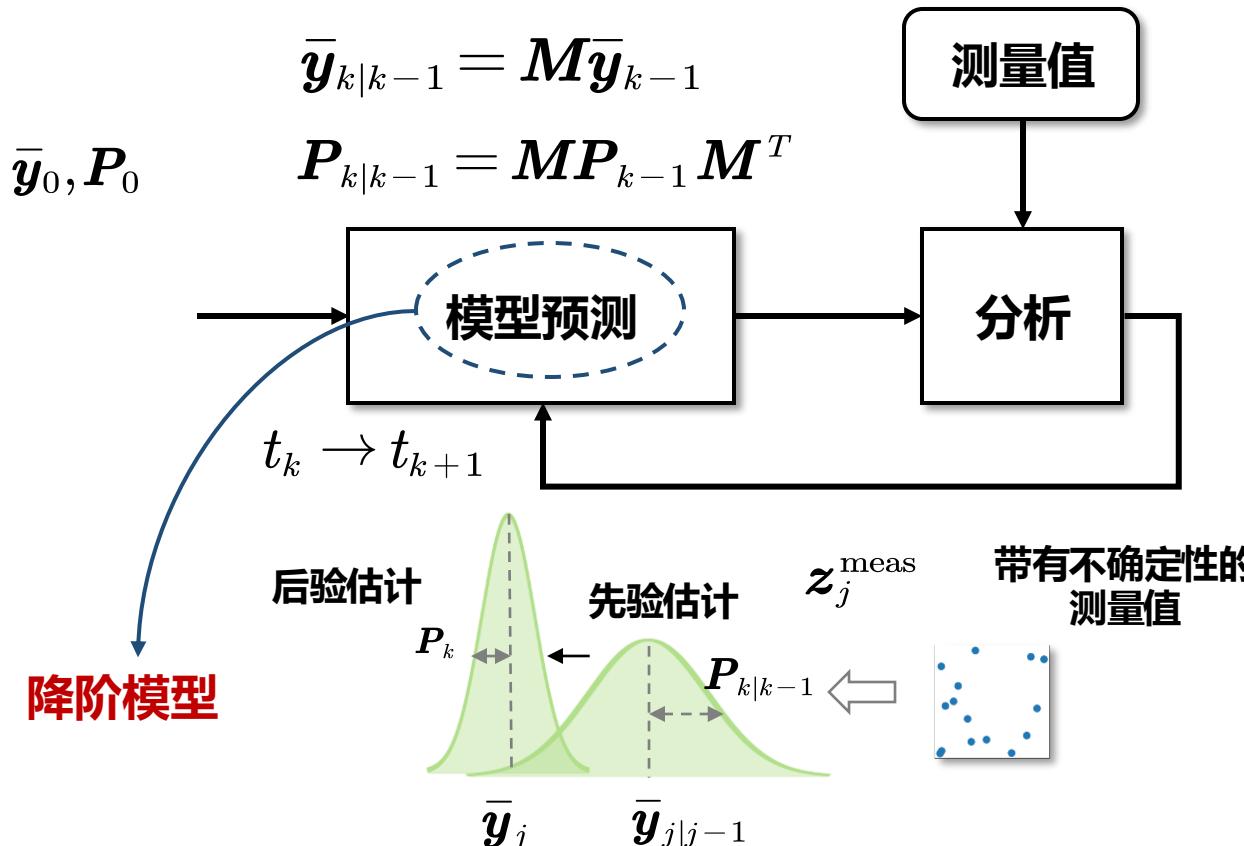
研究结论



卡尔曼滤波数据同化

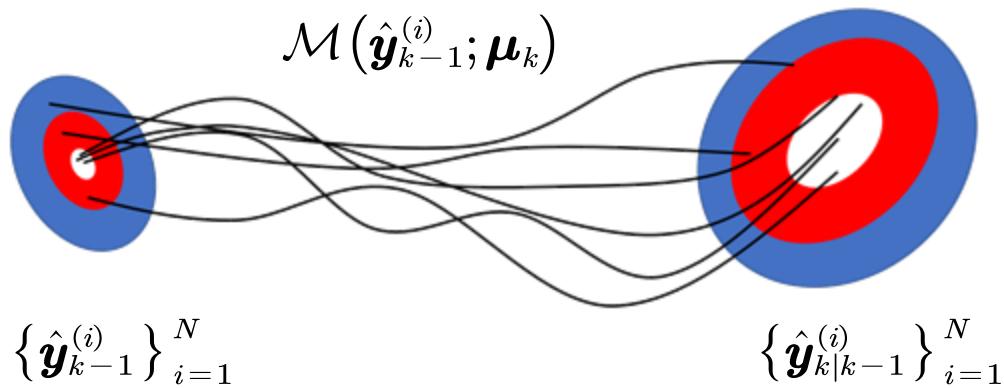


结合预测模型与测量数据，求解优化问题，获得系统状态的**最优估计**，量化并减少系统状态中的**不确定性**；降阶预测模型使得最优化问题能够被**快速求解**



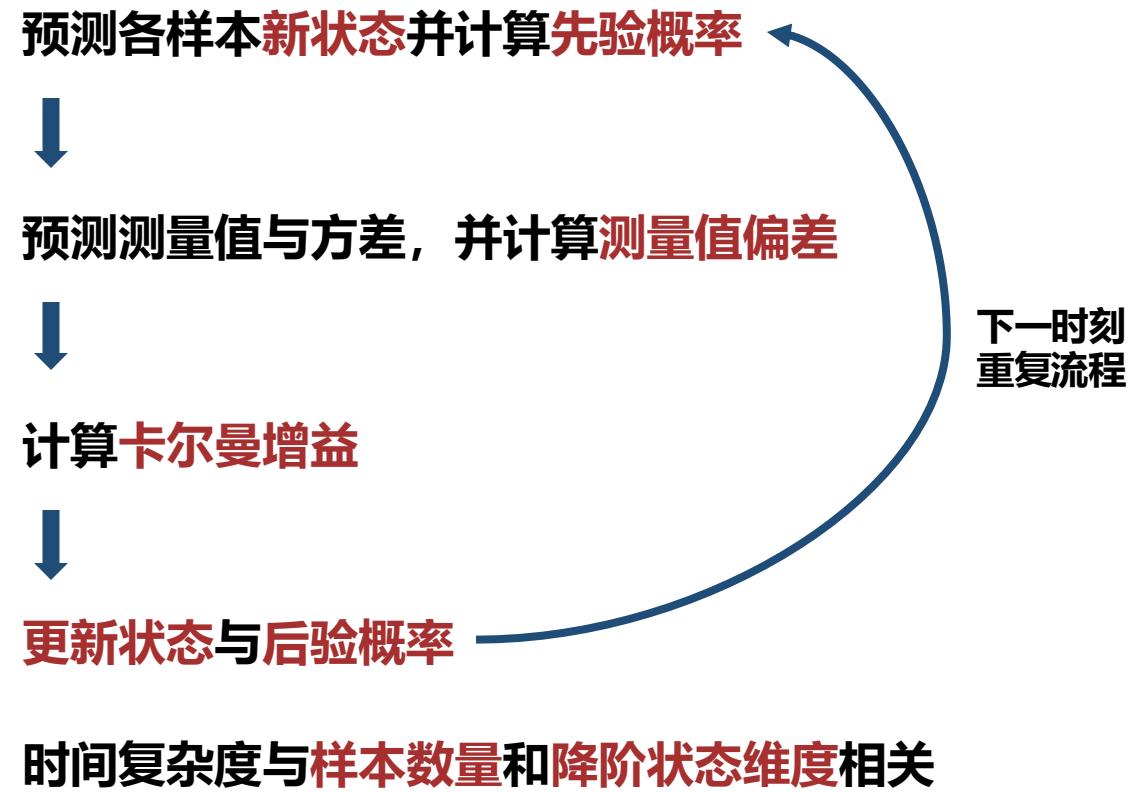
融合测量值获得状态向量的**最优后验估计**

采用样本集合的统计量描述降阶状态的概率分布；对状态转移函数 \mathcal{M} 与样本概率分布无需引入近似或假设，可应用于**非线性、非高斯分布的系统**



从**状态-观测交叉协方差**与**观测协方差**定义增益矩阵

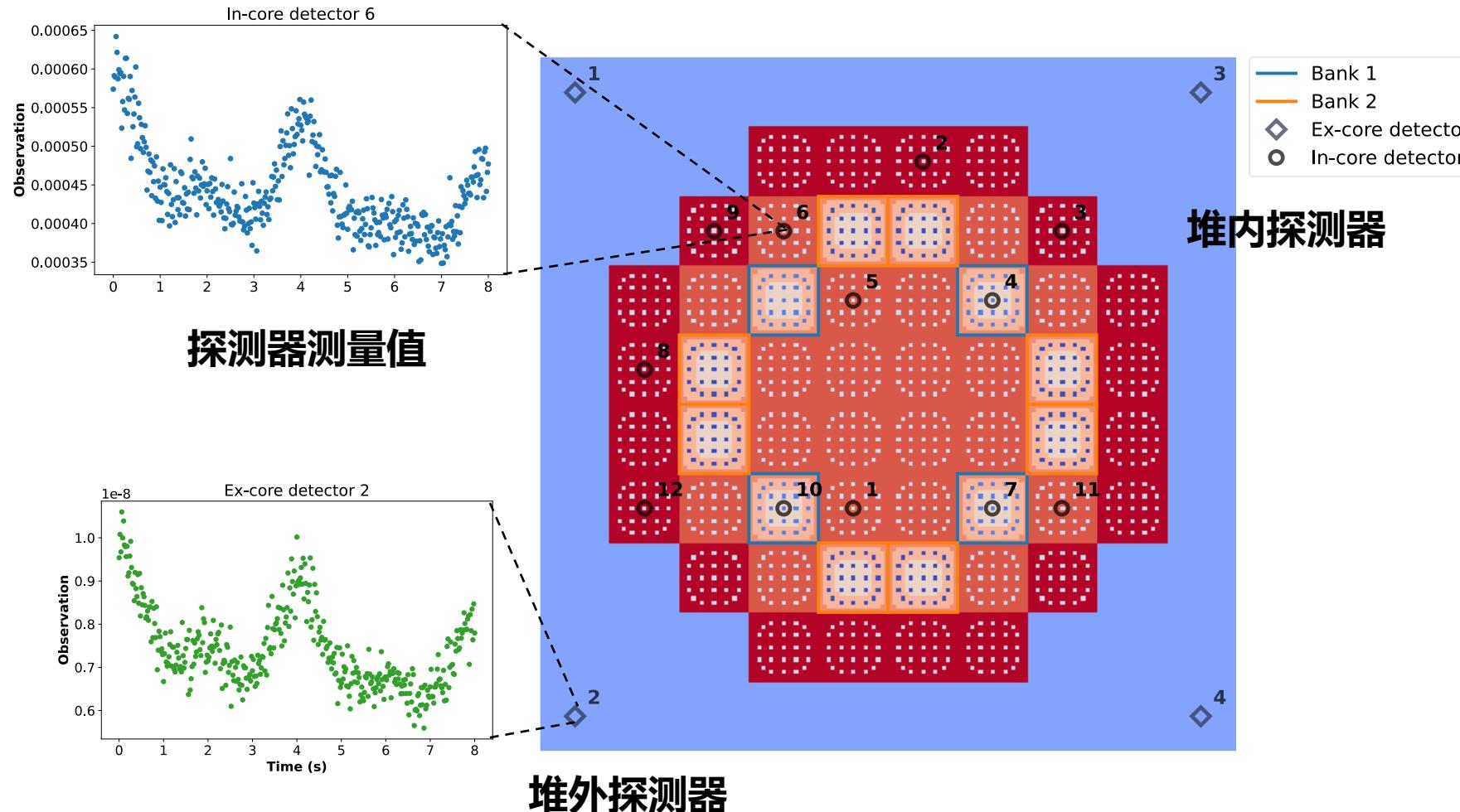
$$K_k = \hat{\mathbf{P}}_{yz} \hat{\mathbf{P}}_{zz}^{-1} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{P}}_{yz} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\hat{\mathbf{y}}_{k|k-1}^{(i)} - \bar{\hat{\mathbf{y}}}_{k|k-1}) (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1})^T \\ \hat{\mathbf{P}}_{zz} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1}) (\mathbf{z}_k^{(i)} - \bar{\mathbf{z}}_{k|k-1})^T \end{array} \right.$$



数据同化方法的验证与分析



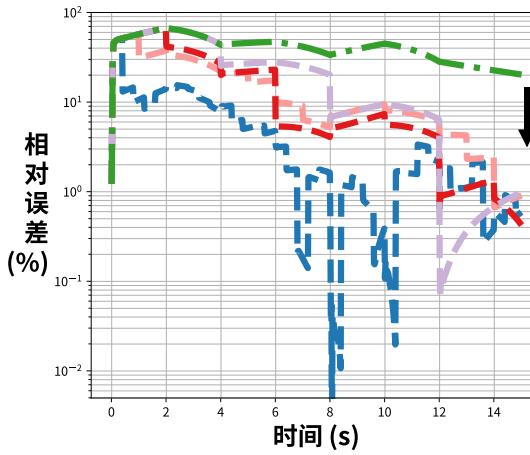
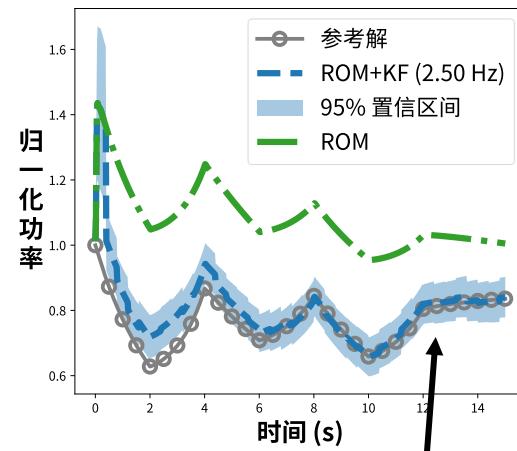
在初始条件存在偏差的情况下，通过线性卡尔曼滤波结合测量数据，修正堆芯中的中子通量、功率、先驱核等高分辨率物理场，并量化不确定性



数据同化方法的验证与分析

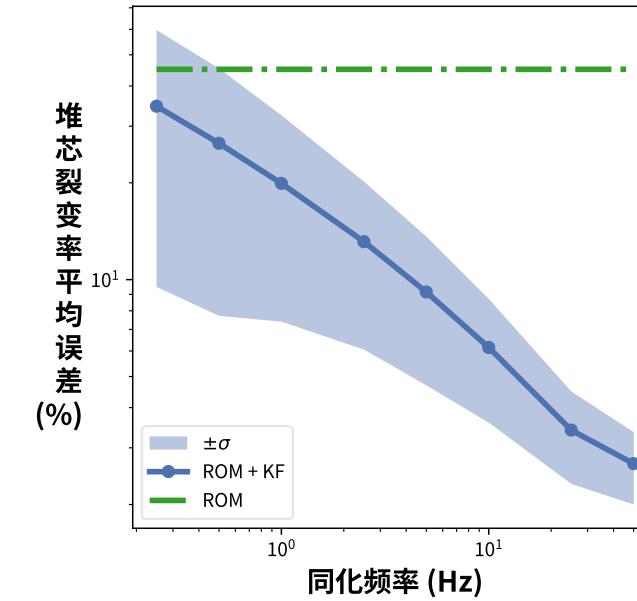


采用不同的随机初始条件与同化频率进行测试，直接模拟的平均误差为46%，同化频率为2.5 Hz时误差下降至13%



降低预测误差

ROM+KF (2.50 Hz)
ROM+KF (1.00 Hz)
ROM+KF (0.50 Hz)
ROM+KF (0.25 Hz)
ROM



误差随着同化频率0.5阶的代数收敛

修正预测值收敛至真实值

同化频率	误差
0 Hz	35%
2.5 Hz	13%
10 Hz	6%
50 Hz	3%

数据同化方法的验证与分析



当时变参数 $\mu(t)$ 存在不确定性或未知时，对参数引入随机游走模型，构造参数与系统状态的动力系统，通过集合卡尔曼滤波在修正物理场并对时变参数进行推断

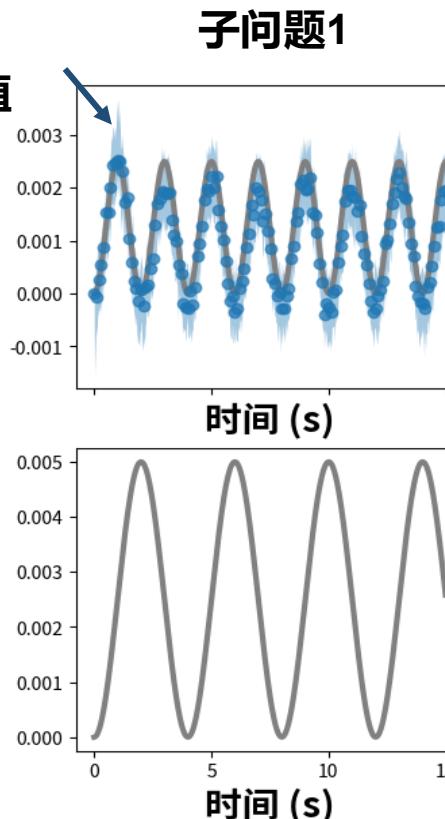
参数动力学由随机游走描述

$$\hat{y}_{k|k-1}^{(i)} = \mathcal{M}(\hat{y}_{k-1}^{(i)}; \mu_{k-1}^{(i)})$$

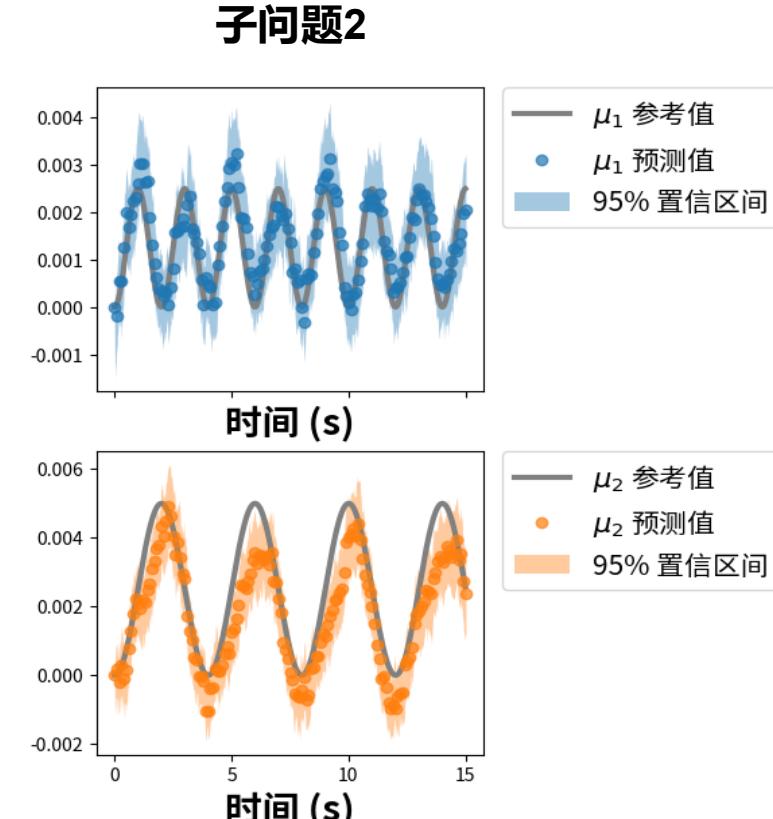
$$\mu_{k|k-1}^{(i)} = \mu_{k-1}^{(i)} + (\delta_\mu^{(i)})$$

随机游走噪声

推断参数
趋近于真实值



参数1未知，参数2已知



参数1未知，参数2未知

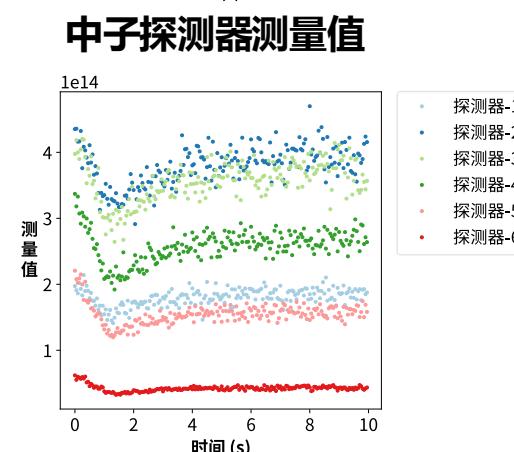
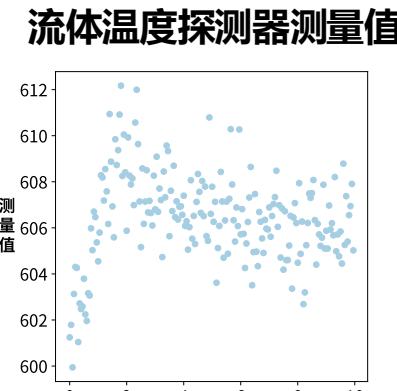
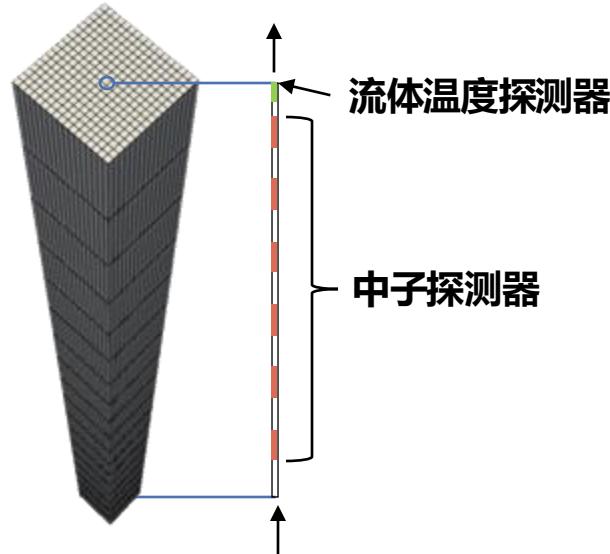
获得时变参数的最优估计与不确定性

数据同化方法的验证与分析



在入口流量扰动未知的情况下，通过随机游走与集合卡尔曼滤波结合中子、冷却剂温度测量数据，修正堆芯中的多物理场，并推断入口流量随时间的变化

探测器布置



动力学模型

降阶预测模型

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \hat{\psi} \\ \hat{T}_s \\ \hat{T}_f \\ \hat{C}_1 \\ \vdots \\ \hat{C}_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{O}_{1,1} & \hat{O}_{1,2} & \hat{O}_{1,3} & & & & & & \\ \hat{O}_{2,1} & & & \hat{O}_{2,4} & \hat{O}_{2,5} & & & & \\ & & \hat{O}_{3,4} & \hat{O}_{3,5} & \hat{O}_{3,6} & & & & \hat{O}_{3,8} \\ \hat{O}_{41,1} & & & & & \hat{O}_{41,71} & & \ddots & \\ \vdots & & & & & & & & \\ \hat{O}_{4n_d,1} & & & & & & & & \hat{O}_{4n_d,7n_d} \end{bmatrix} \quad \mathbf{F}_s \quad \varphi$$

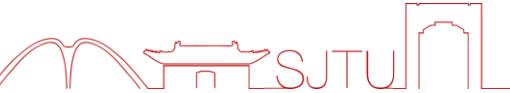
参数（入口流量扰动）随机游走模型

$$\frac{d}{dt} \mu = 0$$

降阶观测模型

$$\begin{bmatrix} \mathbf{z}_\psi \\ \mathbf{z}_T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_\psi \mathbf{U}_\psi & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{T_f} \mathbf{U}_{T_f} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}_f \\ \hat{\mathbf{C}}_1 \\ \vdots \\ \hat{\mathbf{C}}_{n_d} \end{bmatrix}$$

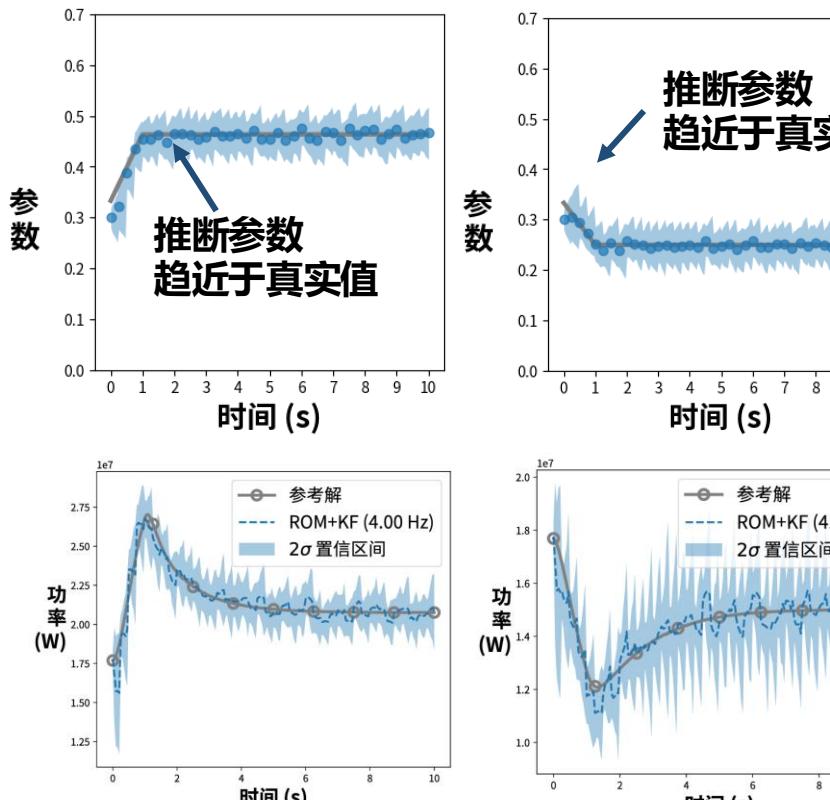
数据同化方法的验证与分析



在同化频率为4Hz时，该方法能够以**4.86%**的平均误差跟踪入口流量的未知变化，功率平均误差为**4.41%**，慢化剂出口温度平均误差分别为**0.27 K**

数据同化结果

入口流量推断与功率预测



同化频率对误差的影响

同化频率 (Hz)	功率误差(%)	燃料最高温误差(K)	出口最高温误差(K)
2.0	6.16	24.45	0.44
4.0	4.41	7.83	0.27
10.0	3.04	7.66	0.23
20.0	2.73	6.26	0.19



上海交通大学

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

目录

1

研究背景

2

算子推断方法

3

数据同化方法

4

研究结论

算子推断作为**数据-物理驱动**的降阶动力系统学习方法，具有**易用、可拓展性与可解释性强**的特点

本工作探索了算子推断在时-空输运方程中的应用：

- 裂变率预测上的相对误差均低于1%，加速比达到高达 10^7 ，能够开展超实时预测
- 展示了相关的降阶模型在**数据同化领域**的应用前景；在初值存在误差的情况下，结合测量值使堆芯功率预测误差控制在5%以下



谢谢！

Q & A

张鹏飞 副教授

zhangtengfei@sjtu.edu.cn

上海交通大学

饮水思源 爱国荣校